**Получение, строение и свойства смешаногалогенидных комплексов сурьмы****(III) с катионом гомопиперазина**

***Каримов М.Р.1, Быков А.В.2, Шестимерова Т.А.2, Гончаренко В.Е.3,4, Шевельков А.В.2***

*Студент, 1 курс магистратуры*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,   
факультет наук о материалах, Москва, Россия*

*2Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,   
химический факультет**, Москва, Россия*

*3Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия*

*4Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия*

*E-mail: malik2karimov0@yandex.ru*

Гибридные галогенидные комплексы сурьмы(III) в последнее время привлекают внимание исследователей из-за наличия таких физических свойств как широкополосная фотолюминесценция, диэлектрические эффекты, нелинейно оптическая активность и т. п. Особенно ценным является то, что эти свойства можно тонко настраивать за счёт использования различных комбинаций органических катионов и галогенов с катионом Sb3+. Благодаря всему этому органо-неорганические комплексы сурьмы(III) являются перспективными многофункциональными материалами для оптоэлектроники [1].

В данной работе мы рассматриваем введение в структуру двух различных по размеру галогенов как ещё один подход к тонкой настройке физико-химических свойств. В докладе будут представлены результаты исследования смешанных хлоридных и иодидных комплексов сурьмы(III) с органическим катионом гомопиперазина, влияние условий синтеза на строение продукта, оценка ширины запрещенной зоны полученных соединений и их термические свойства.

В рамках работы были проведены серии поисковых синтезов растворными методами, в которых варьировались концентрации кислот и реагентов. В результате нами получено три новые фазы – (HpipeH2)2(SbCl2I3)(Cl)2, в структуре которой отмечены зигзагообразные цепи из искажённых октаэдров с упорядоченным расположением в них атомов иода и хлора, и две полиморфные модификации соединения (HpipeH2)3(Sb2ClxI9-x)2 – триклинная и моноклинная, в которых выявлены зигзагообразные цепи из искажённых биоктаэдров с неупорядоченным расположением в них атомов иода и хлора. Установлено, что основным продуктом синтезов является моноклинный (HpipeH2)3(Sb2ClxI9-x)2, при увеличении концентрации кислот и соотношения Hpipe:Sb до 4:1 образуется (HpipeH2)2(SbCl2I3)(Cl)2. Была проведена серия синтезов соединения (HpipeH2)3(Sb2ClxI9-x)2 с варьированием соотношения HI:HCl от 1:9 до 10:0. Отмечено, что соединение (HpipeH2)3(Sb2ClxI9-x)2 при молярном соотношении HI:HCl < 3:7 кристаллизуется в триклинной сингонии, а при увеличении содержания иода и уменьшении содержания хлора – в моноклинной сингонии. Показано уменьшение ширины запрещенной зоны (HpipeH2)3(Sb2ClxI9-x)2 по мере изменения молярного соотношения соляной и иодоводородной кислот во время синтеза с 9:1 до 4:6 – с 3.04 эВ до 2.22 эВ по прямозонной модели и с 2.65 эВ до 1.88 эВ по непрямозонной, при этом окраска изменяется со светло-жёлтой на красную. По данным термического анализа, (HpipeH2)2(SbCl2I3)(Cl)2 и моноклинный (HpipeH2)3(Sb2ClxI9-x)2 термически устойчивы до 175-185 °С, триклинный (HpipeH2)3(Sb2ClxI9-x)2 менее устойчив и начинает разлагаться при 135 °С.

**Литература**

1. Ya Wang, Chao Shi, Xiang-Bin Han. Mixed Bromine–Chlorine Induced Great Dielectric and Second-Order Nonlinear Optical Properties Changes in Phase Transitions Compounds [H2mdap][BiBr5(1-x)Cl5x] (x = 0.00–1.00) // J. Phys. Chem. C. 2017. Vol. 121. № 41. P. 23039 – 23044.